Simulations de cinétiques et d'équilibres

Stéphane Mottelet, et André Pauss
Université de Technologie de Compiègne, B.P. 20.529, 60205 Compiègne Cédex
stephane.mottelet@utc.fr, andre.pauss@utc.fr

Résumé

Nous avons développé un environnement de génération automatique de simulations entièrement basé sur les technologies XML. Le langage de description proposé permet de décrire des objets mathématiques tels que des systèmes d'équations différentielles, des systèmes d'équations non-linéaires, des équations aux dérivées partielles en dimension 2, ou bien de simples courbes et surfaces. Il permet aussi de décrire les paramètres dont dépendent ces objets. Ce langage est indépendant du logiciel et permet donc de garantir la pérennité du travail des auteurs ainsi que leur mutualisation et leur réutilisation. Adossé à cet environnement, nous avons également développé une «chaîne de compilation» qui permet de transformer ces fichiers XML sous forme de scripts et de les faire fonctionner dans le logiciel Scilab (équivalant à Matlab®, mais distribué sous licence GPL par l'INRIA (http://www.scilab.org)).

Avec ce logiciel nous avons simulé les équilibres acido-basiques et différentes cinétiques chimiques et biochimiques. Depuis quatre ans, ces simulations sont utilisées par les étudiants ingénieurs de premier cycle, en complément de l'enseignement traditionnel. Des évaluations réalisées auprès des étudiants après utilisation ont permis de juger de l'opportunité et de l'intérêt de telles simulations.

Ce développement a été initialement financé par le Pôle régional de recherche Système et Technologie pour l'Enseignement et l'Education, de Picardie, il est actuellement soutenu par le consortium UNIT (Université Numérique en Ingénierie et.Technologie, http://www.unit-c.fr).

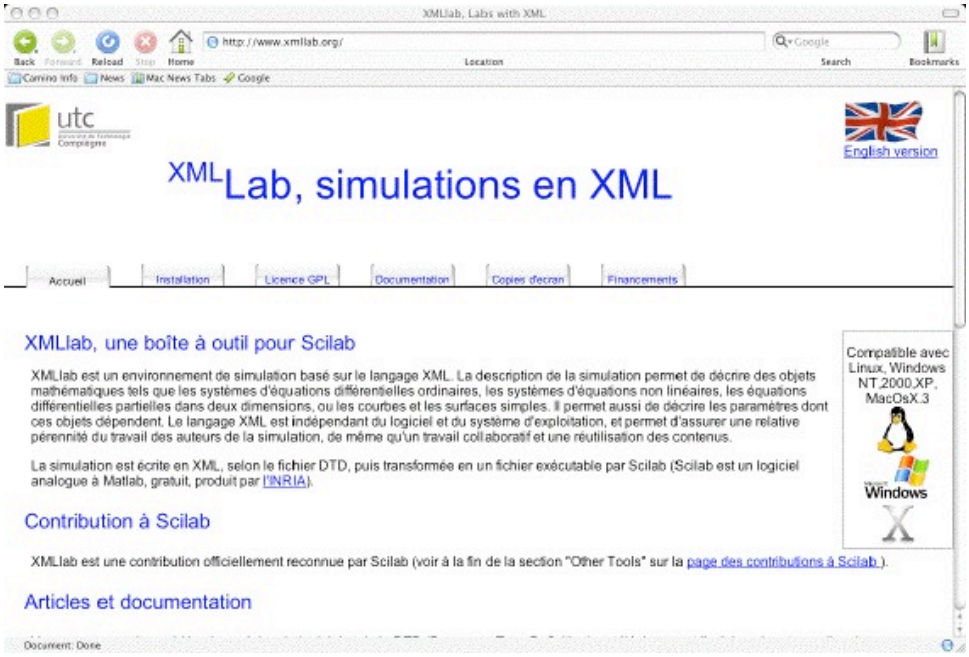
Logiciel XMLlab (*)

Le logiciel sépare la création de la simulation, par l'enseignant, de son utilisation, par les étudiants. L'objectif du projet était de concevoir un logiciel de simulation basé sur des logiciels open-source, indépendant de la plate-forme informatique (Windows, MacOSX, Unix), et utilisable par tout enseignant, quelle que soit son expérience en informatique. Une formulation en langage XML a permis de répondre à ces objectifs.

La structuration des possibilités du logiciel est contrainte par une DTD (Document Type Definition). Cette contrainte clarifie les possibilités offertes au créateur et rend l'écriture de la simulation assez aisée. Sont définis : les paramètres de la simulation. (scalaires, matrices, groupes de paramètres, bases de données), les modèles mathématiques utilisés (domaines, courbes et surfaces, équations différentielles, non linéaires ou aux dérivés partielles), l'affichage des résultats (courbes 2D, 3D, points), et les données à sauvegarder. Les courbes simulées peuvent être confrontées à des données expérimentales. Enfin la langue des commentaires, textes, notes peut être choisie à l'exécution ; le français, l'anglais, l'allemand et l'espagnol sont actuellement reconnus.

Le fichier XML créé est ensuite compilé en fichiers exécutables par Scilab. Le choix de Scilab garantit la pérennité de la simulation, ainsi que la robustesse des algorithmes utilisés, particulièrement pour la résolution des équations différentielles. Les fichiers créés peuvent être utilisés et distribués librement sans faire appel à la chaîne de compilation, garantissant ainsi à son créateur la protection de son travail. Des simulations ont été écrites en biologie (cinétiques enzymatique et microbienne), physique (pendule, fentes de Young, équation de Poisson, système à trois corps, etc.), mathématiques (courbes de Gauss, de Lissajous, cycloïdes, fonctions polynomiales, etc.), chimie (équilibres acide/base, cinétiques chimiques), génie chimique (réacteurs idéaux).

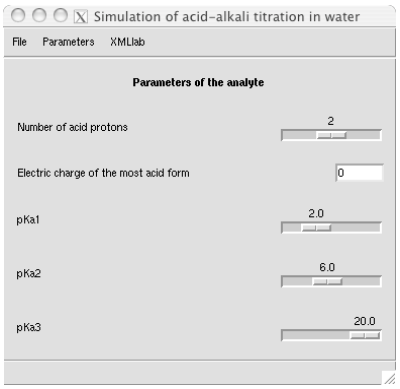
Le logiciel est distribué sous licence GPL, sur le site éponyme http://www.xmllab.org. Des exemples d'application ainsi que le manuel d'utilisation sont également disponibles au téléchargement.

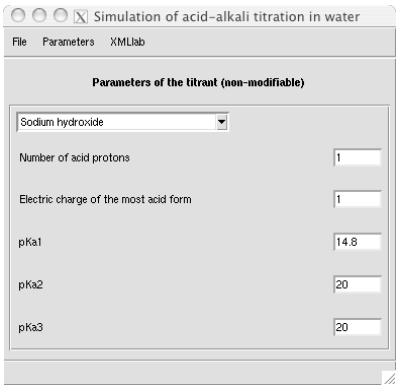

XMLlab, Labs with XML
http://www.xmllab.org/
utc
English version
XMLLab, simulations en XML
Accueil
Installation
Licence GPL
Documentation
Copies d'écran
Financements
XMLlab, une boîte à outil pour Scilab
XMLlab est un environnement de simulation basé sur le langage XML. La description de la simulation permet de décrire des objets mathématiques tels que les systèmes d'équations différentielles ordinaires, les systèmes d'équations non linéaires, les équations différentielles partielles dans deux dimensions, ou les courbes et les surfaces simples. Il permet aussi de décrire les paramètres dont ces objets dépendent. Le langage XML est indépendant du logiciel et du système d'exploitation, et permet d'assurer une relative pérennité du travail des auteurs de la simulation, de même qu'un travail collaboratif et une réutilisation des contenus.
La simulation est écrite en XML, selon le fichier DTD, puis transformée en un fichier exécutable par Scilab (Scilab est un logiciel analogue à Matlab, gratuit, produit par l'INRIA).
Compatible avec Linux, Windows NT,2000,XP, MacOsX.3
Windows
Contribution à Scilab
XMLlab est une contribution officiellement reconnue par Scilab (voir à la fin de la section "Other Tools" sur la page des contributions à Scilab).
Articles et documentation
Document: Done

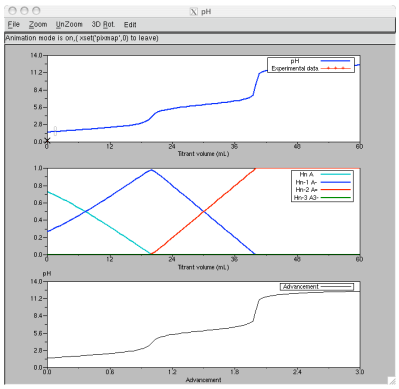
Utilisation dans l'enseignement de la chimie

Les équilibres acido-basiques ont été simulés avec XMLlab, sur base d'équations développées auparavant (9ème MIEC, Bruxelles, 1999). La simulation permet de montrer l'influence des constantes d'équilibre, des concentrations des espèces, de l'eau de dilution, etc. sur les courbes de titrage. L'utilisation de « glissières » pour faire varier la valeur des paramètres permet de rendre compte dynamiquement des changements. Cette simulation est utilisée en cours en démonstration, puis en Travaux Pratiques par 150 étudiants par semestre, en 1er cycle d'ingénieur depuis 4 ans. Une évaluation par questionnaire a permis de se rendre compte de l'intérêt mais aussi des limites de l'usage de cette simulation.

Différentes cinétiques chimiques plus ou moins complexes ont également été simulées par le logiciel.







Paramètres des espèces titrée et titrante

Fenêtre graphique des résultats

Création d'une communauté « métier » en chimie

La diffusion du logiciel auprès des utilisateurs (enseignants et étudiants) nécessite la création de communautés « métier », afin de développer des simulations particulières ou spécialisées et d'encourager leur utilisation dans les établissements. Les auteurs de cette communication souhaitent profiter des présentes journées pour poser les jalons d'une communauté d'utilisateurs en chimie.

Le site web d'XMLlab sera modifié prochainement pour identifier les apports des différents acteurs et communautés.

(*) Le logiciel a été présenté aux JIREC 2004 sous le nom initial de ScilabXML, ce nom a été abandonné depuis au profit d'XMLlab.